

1. Вовкотруб Э.Г., Салюлев А.Б., Стрекаловский В.Н. Вещественный анализ продуктов реакций, протекающих в среде агрессивных сжиженных газов, методом КР-спектроскопии // Проблемы спектроскопии и спектрометрии/ Межвуз. сборник научн. трудов. – Г. Екатеринбург: УГТУ-УПИ. 2010. Вып.26. С.201-208.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФОСФОРА ПО МОЛЕКУЛЯРНОМУ ПОГЛОЩЕНИЮ РО В ПЛАМЕНИ АЦЕТИЛЕН-ВОЗДУХ

Зайцева П.В., Пупышев А.А.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Появление нового типа атомно-абсорбционных спектрометров высокого разрешения с непрерывным источником спектра открыло возможность прямого определения Р, S, F, Cl, Br и I по молекулярному поглощению их двухатомных молекул [1]. В работе [2] изучены условия определения Р по поглощению одной из компонент молекулярной полосы РО в пламени ацетилен-воздух. Найден оптимальный режим анализа, обеспечивающий максимальную чувствительность измерений: расход ацетилена - 2 л/мин, расход воздуха - 14 л/мин, высота наблюдения над горелкой - 10 мм. Показано, что присутствие кальция и магния вызывает сильное подавление молекулярного поглощения РО, что связано с образованием термически устойчивых в данном пламени фосфатов кальция и магния [3]. Полное устранение такого депрессирующего влияния может быть достигнуто добавлением в пробы и градуировочные растворы титана, образующего с кальцием и магнием титанаты, более термически устойчивые, чем фосфаты.

Термодинамическое моделирование проводили с использованием программы TERRA с базой термодинамических данных ИВТАНТЕРМО. Расчетами установлено, что оптимальные условия образования молекулы РО в данном пламени соответствуют эксперименту. Получена теоретическая линейная градуировочная функция в диапазоне концентрации фосфора до 1000 мг/л, что также совпадает с экспериментом.

С использованием термодинамического моделирования изучено влияние кальция и магния на молекулярное поглощение фосфора в данном пламени. Расчеты выполнены для оптимальных условий образования молекул РО и при разных температурах пламени, что соответствует разной высоте наблюдения над горелкой. Установлено, что в присутствии кальция сигнал РО в пламени ацетилен-воздух подавляется за счет

образования термически стабильного фосфата кальция. При молярном соотношении содержаний $\text{Ca/P} = 2,3$ наблюдается полное подавление молекулярного поглощения PO . Добавление титана, согласно расчетам, приводит к устранению помех кальция, в результате образования в пламени конденсированного титаната кальция (CaTiO_3). Для полного устранения влияния кальция на молекулярное поглощение PO в пламени ацетилен-воздух оптимальное молярное соотношение титана к кальцию должно быть не менее, чем $\text{Ti/Ca} = 1.36$. Образование термически стабильного фосфата магния не нашло подтверждения при термодинамическом моделировании.

1. Пупышев А.А. Атомно-абсорбционный спектральный анализ. М.: Техносфера, 2009. 784 с.

2. Huang M.D., Becker-Ross H., Florek S., Heitmann U., Okruss M. Determination of phosphorus by molecular absorption of phosphorus monoxide using a high resolution continuum source absorption spectrometer and an air-acetylene flame // J. Anal. Atom. Spectrom., 2006. V. 21. P. 338-345.

3. Huang M.D., Becker-Ross H., Florek S., Heitmann U., Okruss M. // The influence of calcium and magnesium on the phosphorus monoxide molecular absorption signal in the Determination of phosphorus using a continuum source absorption spectrometer and an air-acetylene flame // J. Anal. Atom. Spectrom., 2006. V. 21. P. 346-349.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФТОРА ПО МОЛЕКУЛЯРНОМУ ПОГЛОЩЕНИЮ GaF и AlF В ПЛАМЕНАХ

Зайцева П.В., Пупышев А.А.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

В работе [1] предложена методика прямого определения фтора по молекулярному поглощению компонент полосы GaF (211 и 214 нм) в пламени ацетилен-воздух с использованием атомно-абсорбционных спектрометров высокого разрешения с непрерывным источником спектра [2]. Наиболее чувствительные условия определения фтора были достигнуты при расходе ацетилена - 3.2 л/мин, расходе воздуха - 17 л/мин и высота наблюдения над горелкой - 14 мм.

Теоретическое изучение условий определения фтора по молекулярному поглощению GaF проводили методом термодинамического моделирования с использованием программы TERRA с базой термодинамических данных ИВТАНТЕРМО. Расчетами, выполненными для